Physique Numérique sem. 28

- **4.3 Mécanique quantique – Eq. de Schrödinger**
  - **4.3.1 Schéma semi-implicite de Crank-Nicolson**
    - **Conservation de la probabilité totale (preuve)**
  - **4.3.2 Particule libre. Paquet d'onde. Etalement.**
    - **Faire partir le paquet d'onde vers la gauche**
  - **4.3.3 Barrière de potentiel. Effet tunnel.**
    - **Que se passe-t-il lors de la détection d'une particule?**
    - **«Réduction» du paquet d'ondes**
  - **4.3.4 Oscillateur harmonique**
    - **Etats cohérents (→ semi-classique)**
  - **4.3.5 Etats stationnaires**
    - **Puits de potentiel**
    - **Potentiel périodique (→ physique du solide)**
  - **Exercice 8. À rendre ce vendredi 2 juin**

- 4.3.5 Etats d'énergie bien déterminée:

$$\boxed{\psi(\vec{x},t)=\Psi(\vec{x})\exp(-i\omega t)} \qquad \omega = E/\hbar$$

- Eq. de Schrödinger stationnaire

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi+V\psi=E\psi} \quad \boxed{H(\psi)=E\psi}$$

Les énergies possibles de la particule sont les valeurs propres de l'Hamiltonien. Les fonctions propres correspondantes sont appelées états propres.

- Discrétisation $\quad x_j,\ j=1..N \qquad \Psi_j=\Psi(x_j)$

$$\boxed{\sum_j \mathrm{H}_{ij}\Psi_j=E\Psi_i}$$

Les énergies possibles de la particule sont approximées par les valeurs propres de la matrice H résultant de la discrétisation de l'Hamiltonien. Les états propres sont approximés par les vecteurs propres de H. → $\{\Psi_{(n)}, E_n\}$

Principe de superposition

- Solution Générale de Schroedinger = superposition d'états propres:

$$\boxed{\psi(\vec{x},t)=\sum_n c_n \Psi_n(\vec{x})\exp(-iE_n t/\hbar)}$$

- $|c_n|^2$: probabilité que la particule soit dans l'état no n

- D'où une autre méthode, dite *spectrale*, de résolution de Schroedinger:
  - Opérateur H : calcul des fonctions et valeurs propres $\{\Psi_n(x), \mathrm{E_n}\}$
  - → Matrice H : calcul des valeurs et vecteurs propres $\{\Psi_n(x_i), \mathrm{E_n}\}$
  - Calcul des $c_n=\int \Psi^*{}_n(\vec{x})\psi(\vec{x},0)dx$ → $c_n=\sum_j \Psi_n^*(\mathrm{x_i})\psi(x_i,0)$
    (projection sur les états propres)
  - La solution numérique est:

$$\psi(x_i,t_j)=\sum_n \mathrm{c_n}\Psi_n(x_i)\exp\left(-\frac{iE_n}{\hbar}t_j\right)$$

- Voir aussi http://falstad.com/qm1d/

Puits

- Particule dans un puits de potentiel de profondeur finie

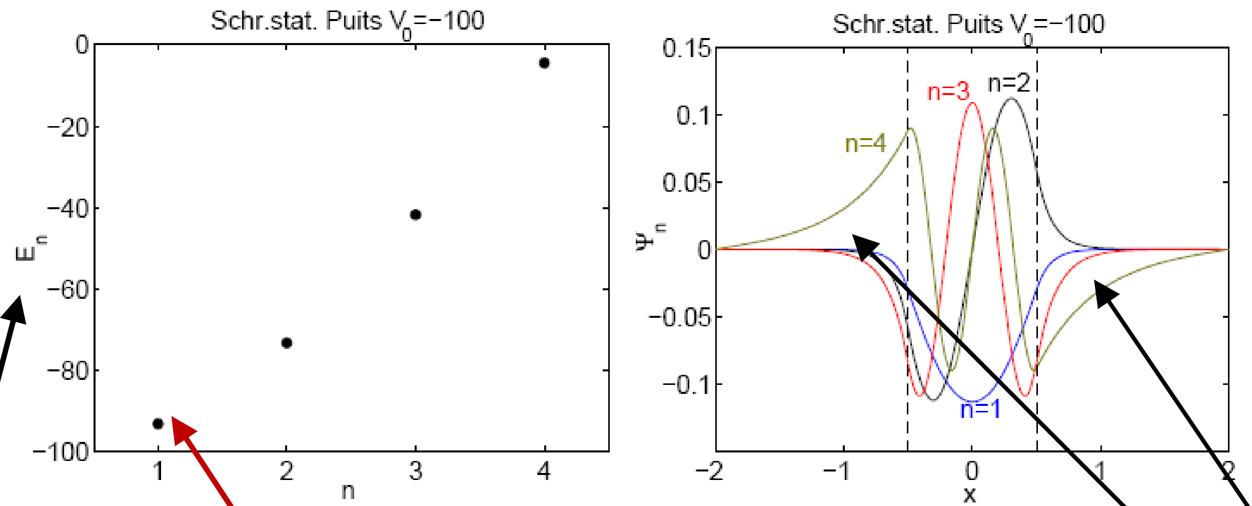


FIG. 4.25 – *Spectre des énergies propres (à gauche) et les 4 premiers états propres (à droite) pour une particule confinée dans un puits de potentiel de profondeur finie,* $V_0 = -100$, *entre* $x = -0.5$ *et* $x = +0.5$ *(lignes traitillées).*

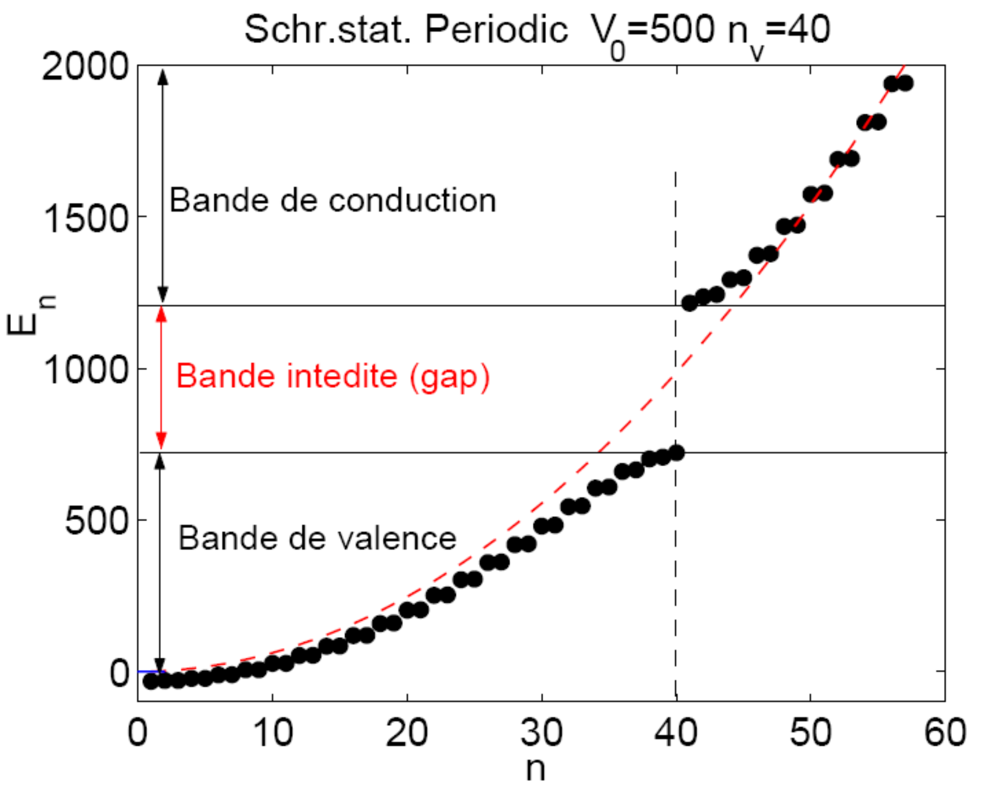
Seul un nombre fini de valeurs négatives de l'énergie est possible: «spectre discret». Etat fondamental E>min(pot)

La particule a une probabilité de présence non nulle en dehors du puits

Etats d'énergie positive: «spectre continu»

- Particule dans un potentiel périodique. Solide

$$V(x) = V_0 \sin\left(n_{\mathrm{pot}} \frac{2\pi x}{L}\right)$$



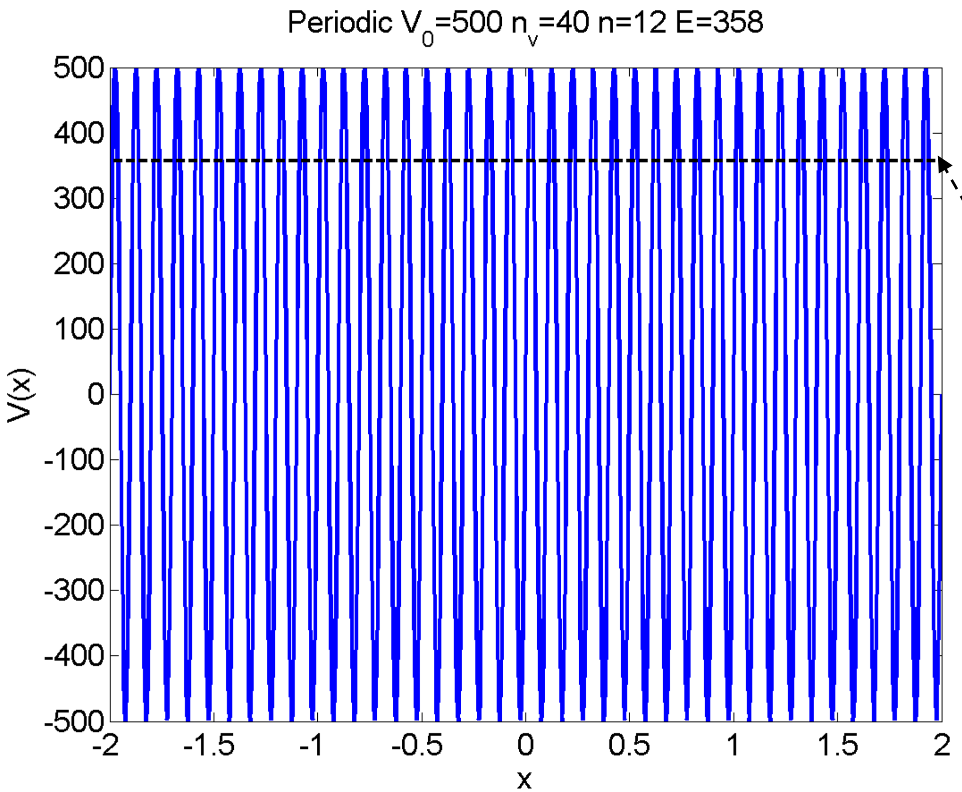
Retour vers Schroedinger dépendant du temps

- Plaçons un paquet d'onde initial dans un potentiel périodique
- Observons comment ce paquet d'onde se propage dans le système
- Le premier paquet d'onde a une énergie inférieure au maxima du potentiel
- Le deuxième paquet d'onde a une énergie supérieure au maxima du potentiel
- … QUIZ: qui va gagner la course?

Potentiel périodique

- Energie inférieure aux maxima de V

$$V(x) = V_0 \sin\left(n_{\text{pot}} \frac{2\pi x}{L}\right)$$



Paquet d'onde initial:

$$\psi(x,0) = Ce^{ik_0 x} e^{-(x-x_0)^2/2\sigma^2}$$

$$k_0 = \frac{2\pi n}{x_r - x_l}$$

Energie (esp.math.) de la particule

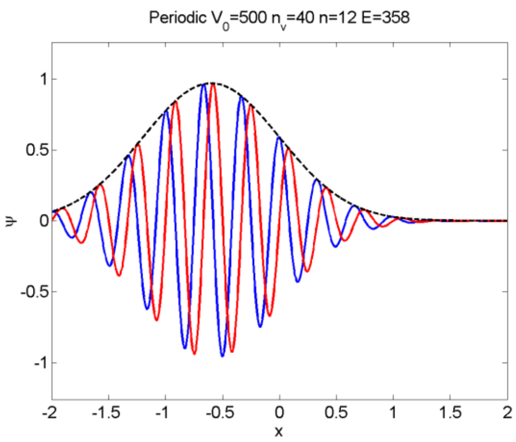
$$\langle E \rangle = (\psi, H(\psi))$$

$$\approx \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m}$$

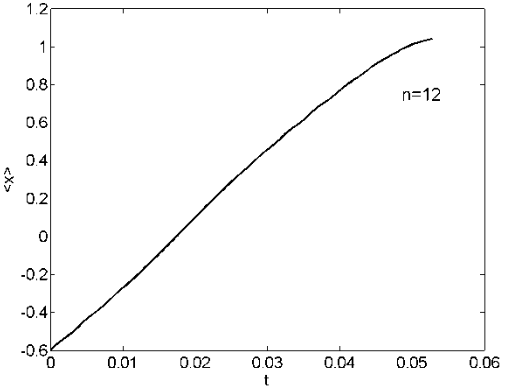
Potentiel périodique

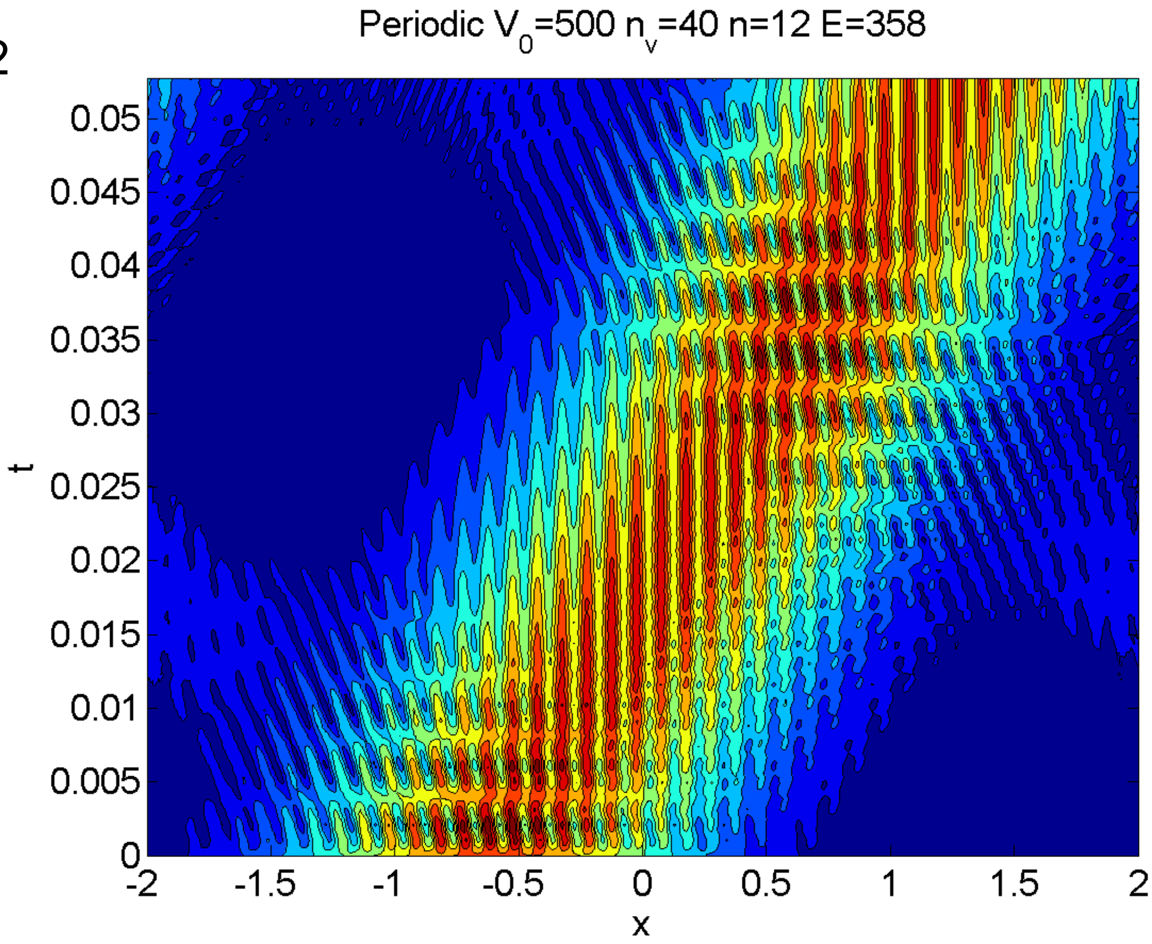
- La particule arrive quand même à avancer!

Paquet d'onde initial n=12

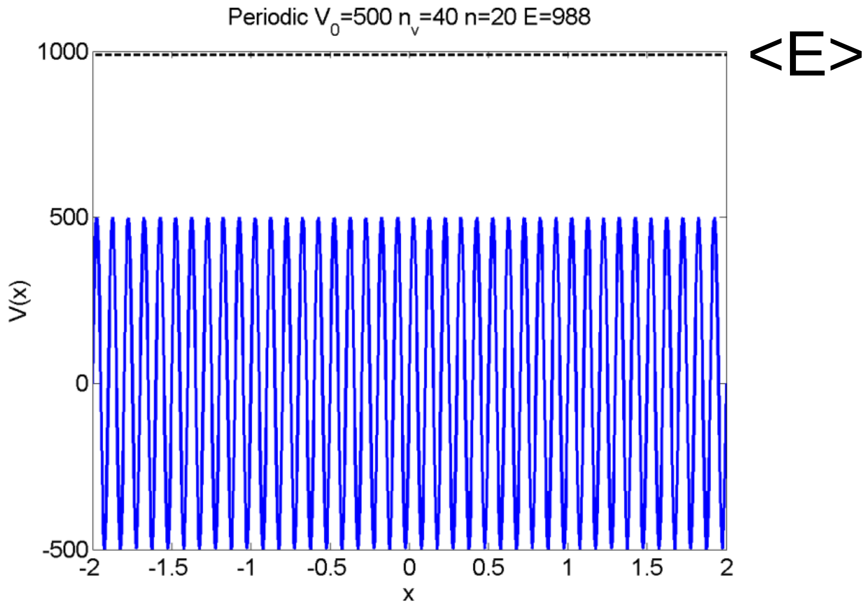


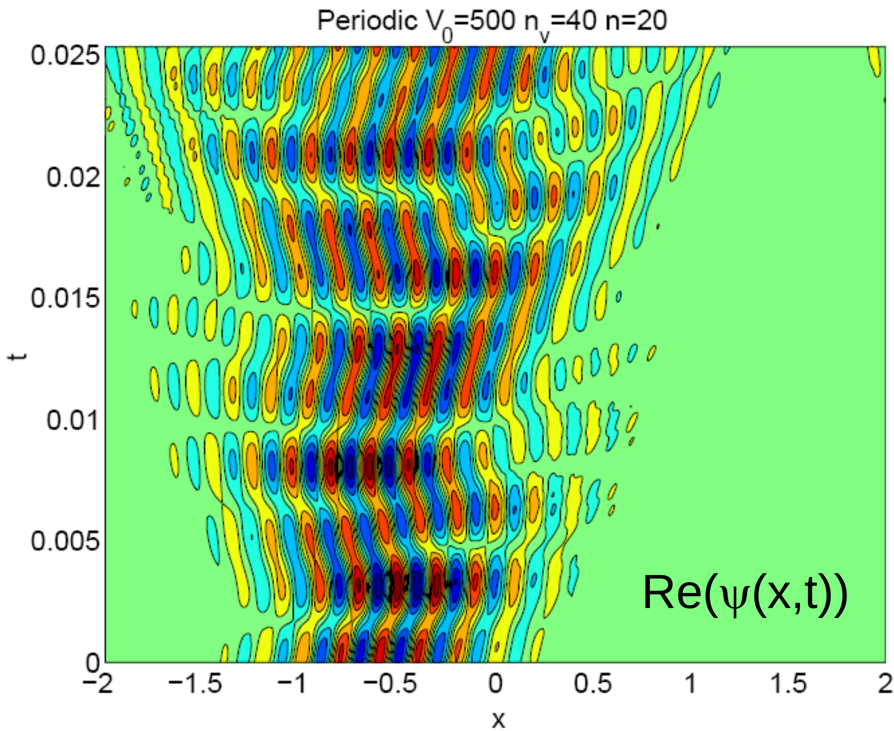
Position moyenne





- Energie supérieure aux maxima de V, … et pourtant la particule n’arrive pas à avancer!



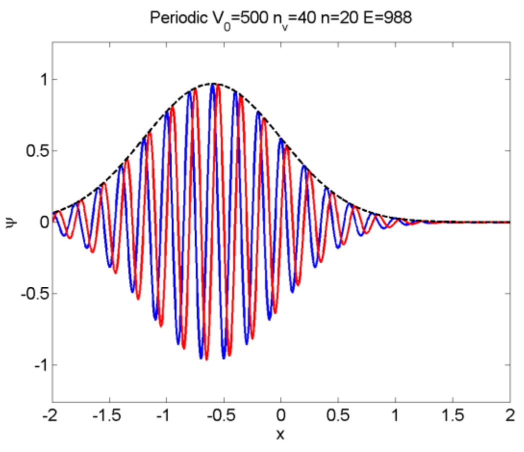


L’énerige de la particule est bien supérieure au maximum du potentiel.

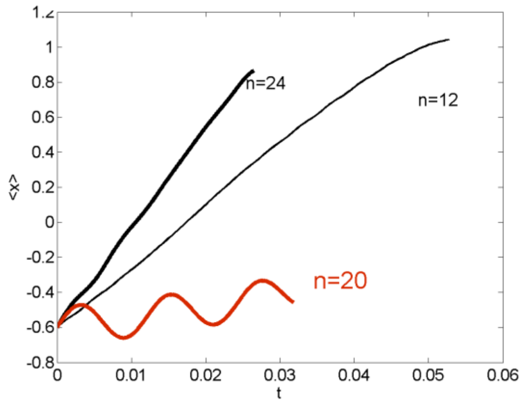
Pourquoi la particule n’arrive-t-elle pas à avancer ?

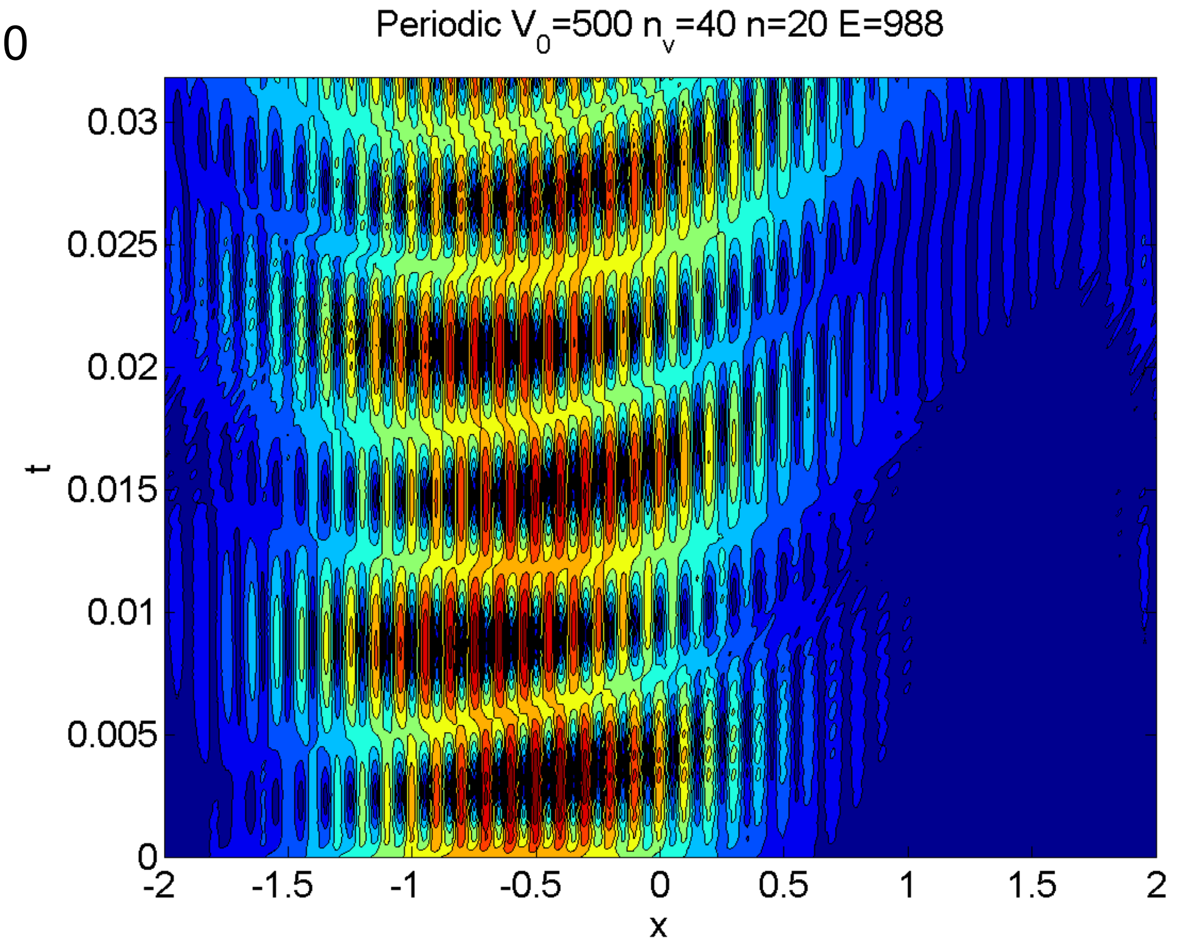
- Longueur d'onde = 2 x périodicité du potentiel

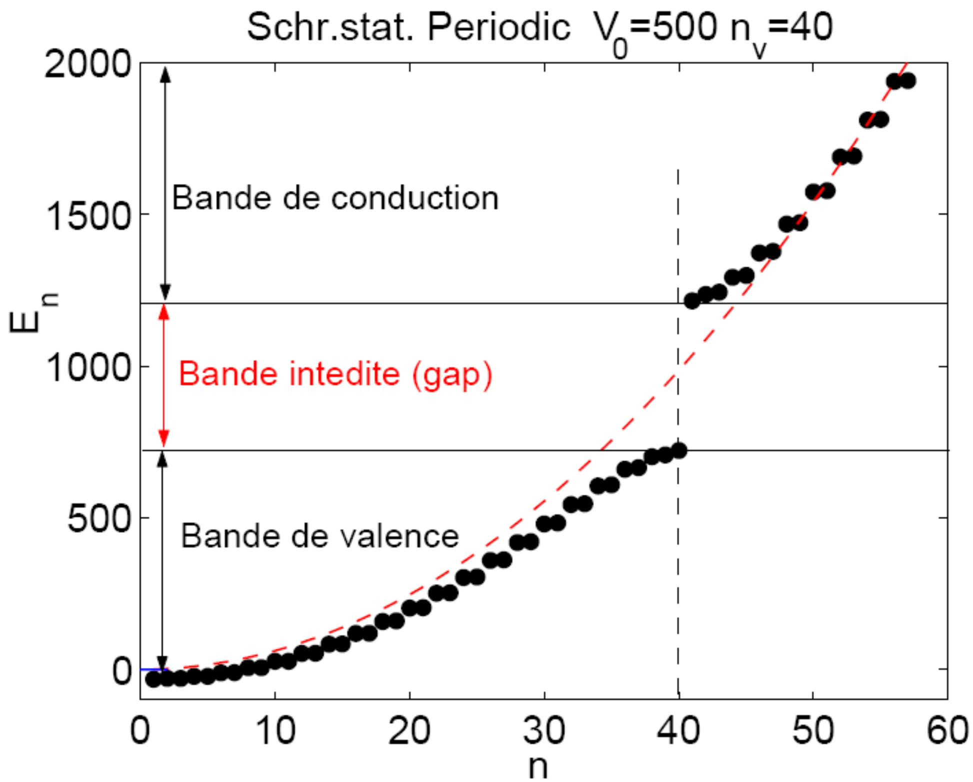
Paquet d'onde initial n=20



Position moyenne



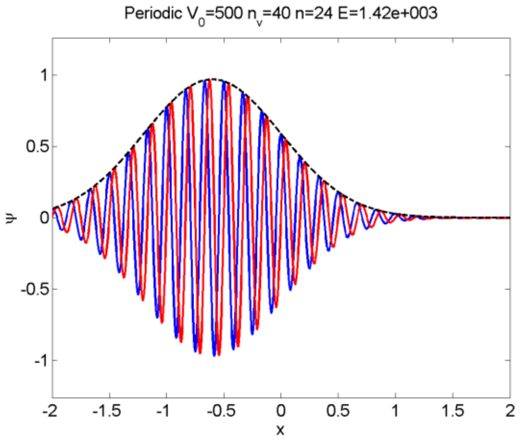




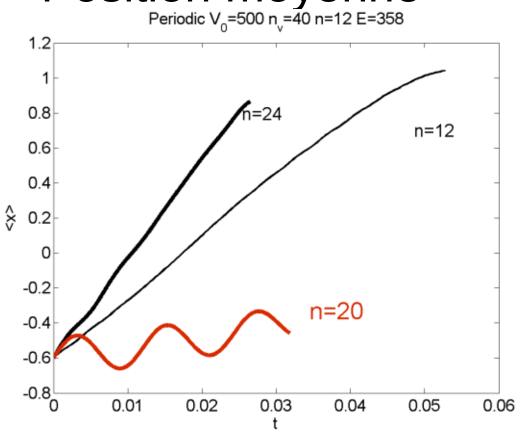
- On est autour du mode n=40 → gap
- La vitesse de groupe est nulle au voisinage du gap → le paquet d’onde a une vitesse nulle

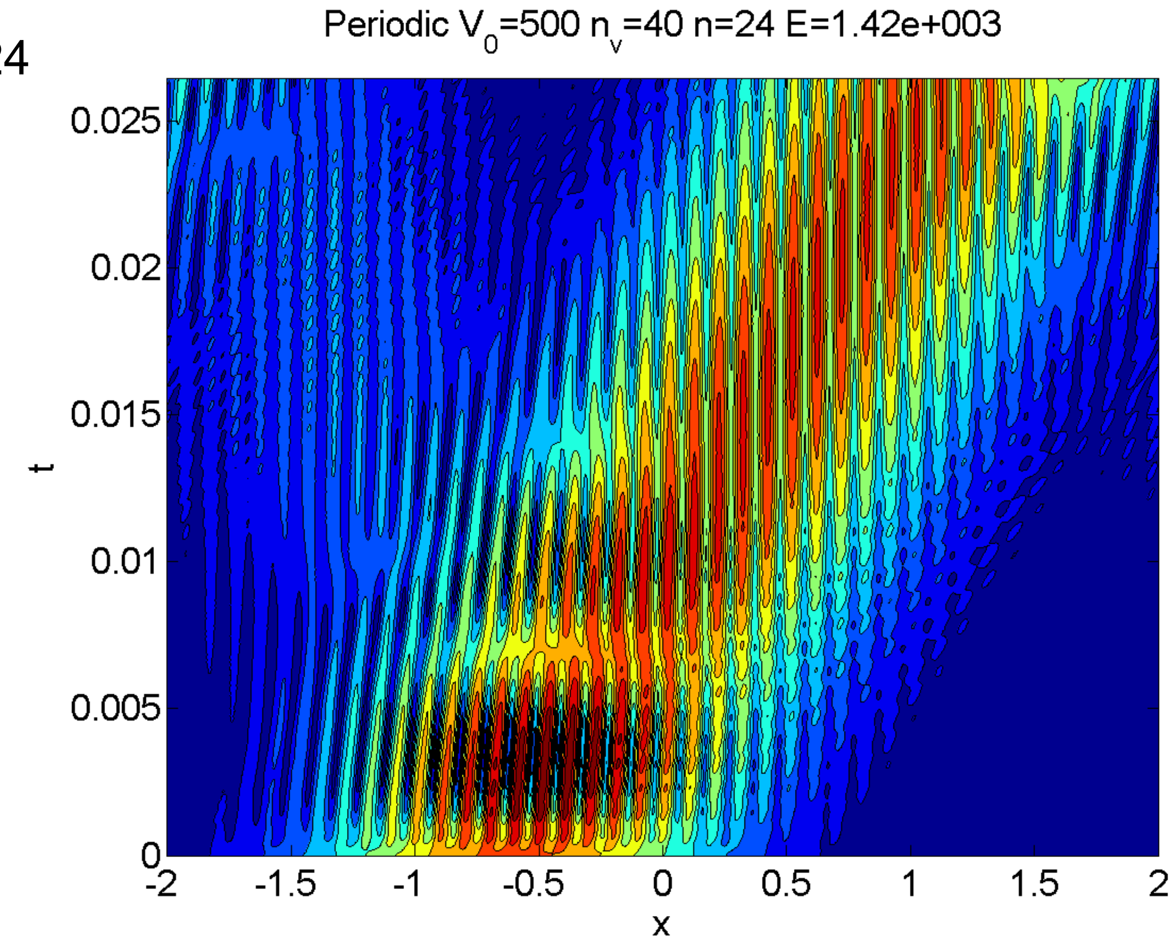
- Energie encore plus élevée, au dessus du gap

Paquet d'onde initial n=24

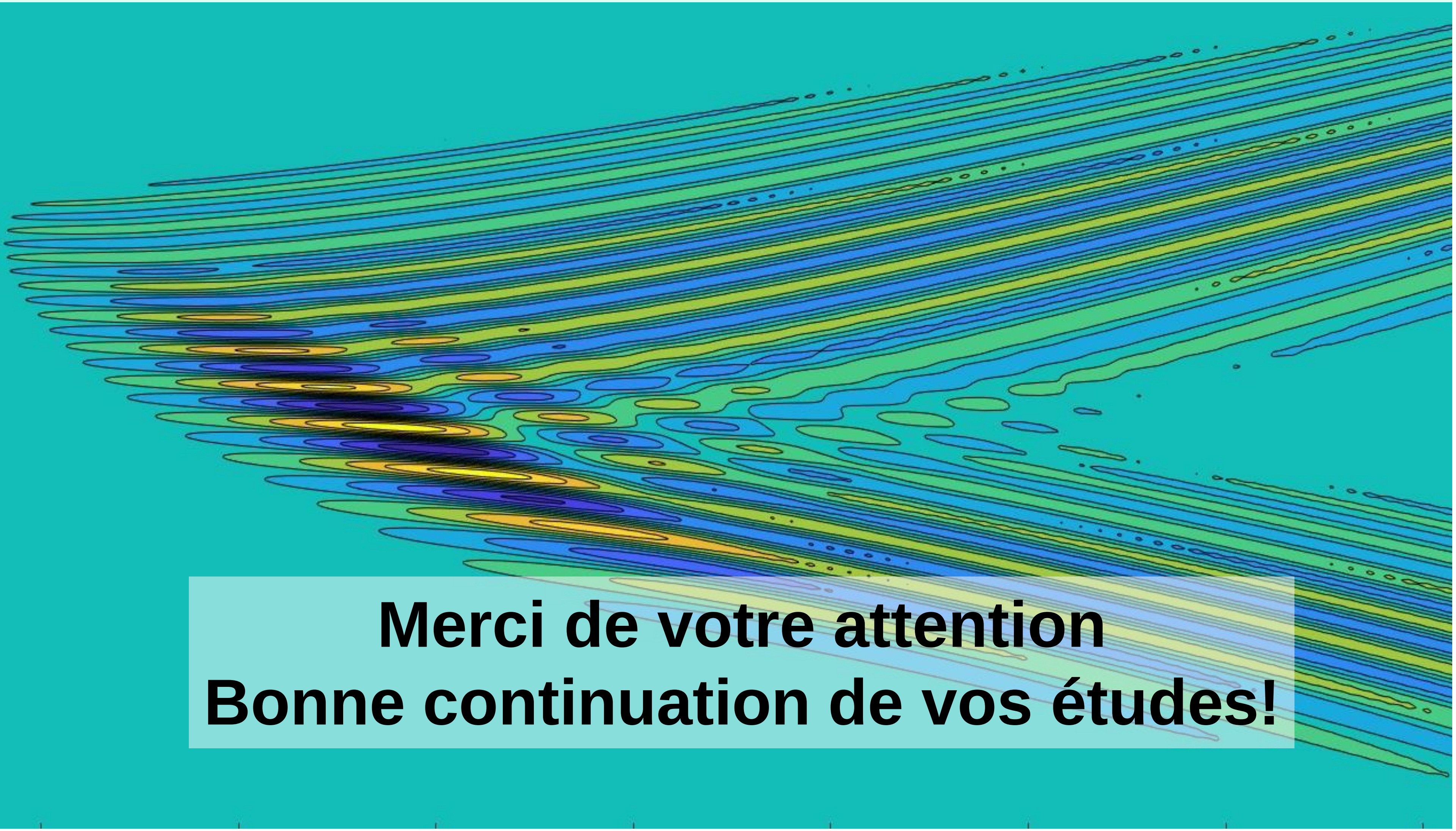


Position moyenne





Physique Numérique I-II



Merci de votre attention

Bonne continuation de vos études!